

Simulación de Sistemas: FHP Lattice-Gas

Sespede Braulio, Julian Nicastró

March 29, 2017

1 Fundamentos

Resolver y predecir el flujo de fluidos es una tarea importante para ingenieros, físicos y matemáticos. Puede ser una tarea matemáticamente compleja para dominios con espacios de geometría compleja. Por este motivo, es deseable simularlo en vez de resolverlo con las ecuaciones originales de Navier-Stokes. Con este propósito se diseñaron modelos como el del “lattice gas” y “lattice Boltzmann” para simular fluidos.

Un automata celular de “Lattice gas”, se caracteriza, como el resto de los automatas celulares, por estar compuesto por partículas dispuestas en una cuadrícula de espacio discreto. Dichas partículas se caracterizan por poseer distintos estados, en el caso del “Lattice gas”, tienen distintas velocidades de igual magnitud pero distinta dirección.

La evolución en el tiempo del sistema es de pasos discretos, donde en cada paso se puede determinar el estado en una posición por el estado de la posición misma y la de sus vecinos antes de que transcurra dicho paso.

En cada paso, el estado de una posición está determinado por la existencia o no de una partícula sobre la misma: existe o no una partícula moviéndose en una dirección. A su vez, en cada paso, se llevan a cabo dos procesos: la propagación y colisión.

En el paso de propagación, cada partícula se moverá a la posición vecina determinada por el vector velocidad de la partícula y posición actual. Excluyendo posibles colisiones, la partícula continuará su trayectoria a la misma velocidad.

En el paso de colisión, se utilizan reglas de colisiones para determinar que sucede si múltiples partículas han de trasladarse a la misma posición a la vez.

En el primer modelo, por Pomeau y de Pazzis, llamado HPP, las partículas solo pueden trasladarse horizontal y verticalmente, y en caso de colisionar pasan a moverse perpendicularmente a su dirección original. La consecuencia de estas restricciones hacen que los vórtices producidos por dicho modelo tengan forma cuadrada.

Posteriormente, se presentó otro modelo por Uriel Frisch, Brosl Hasslacher e Yves Pomeau, donde se permite el movimiento diagonal. Dicho modelo se conoce como FHP en honor a sus investigadores. Según la variante existen 6 o 7 estados posibles por posición. En cualquiera de las variantes, 6 de los estados representan la velocidad con la cual se mueven las partículas a posiciones vecinas (misma magnitud pero distintas direcciones, las de un hexágono). En algunas variantes (llamadas FHP-II y FHP-III), se toma un estado adicional para indicar el reposo de una partícula. Dichas partículas no se propagan a sus vecinos pero pueden colisionar con otras partículas en cada paso de darse el caso.

El modelo básico de FHP contempla colisiones entre dos y tres partículas. Sin embargo, esto basta lograr el comportamiento deseado. Si dos partículas trasladándose en direcciones opuestas se encuentran en la misma posición, el par de partículas rota 60 grados en sentido de las manecillas del reloj o su opuesto, de manera pseudaleatoria. En caso de que la colisión sea entre tres partículas, colisionan de manera que se “invierta” la configuración de partículas. Cualquier otro tipo de colisión puede llevarse a cualquier de los casos anteriores. Ver **Figura 1**.

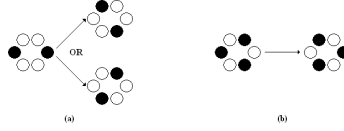


Figure 1: Posibles colisiones en FHP en la misma posición, los puntos negros representan la dirección de los vectores velocidades que colisionan y los puntos blanco los vectores “vacíos”. (a) Colisión entre dos partículas. (b) Colisión entre tres partículas.

2 Implementación

La simulación implementada usando el modelo FHP procede en dos pasos. El primer paso de la simulación es la inicialización con el tamaño del dominio, la cantidad de pasos y el tamaño de la barrera. Se implementó la primera opción en la que cada 4 pasos se inyectan 3 partículas en cada sitio del borde izquierdo con velocidades en 3 direcciones distintas.

Como se comentó anteriormente la simulación tiene en cuenta obstáculos (barrera de tamaño L), a través del cual fluido no puede pasar. Esto se simula haciendo que cuando una partícula colisione con la barrera la misma se refleje en la dirección en la que vino (con el vector dirección rotado 180 grados).

El siguiente paso es el cálculo de colisiones en cada posición (y la propagación) de las partículas. Este proceso se hace en cada paso hasta completar la cantidad de pasos pedidos.

3 Resultados

Si bien el modelo de “lattice gas” es conveniente, sufre de varios problemas.

Uno de ellos es el de la precisión por la simplificación del modelo. Para solucionar este problema se puede tomar un tamaño de dominio más grande y más pasos de simulación. Desafortunadamente, esto requiere el uso de más recursos (ya que habrán más colisiones).

De esto se desprende que de aumentar el tamaño del dominio requerirá más RAM y tiempo de ejecución. Para mejorar el algoritmo podrían hacerse mejoras como paralelizar el procesamiento de colisiones a través de multithreading (o incluso sobre GPU’s).

A continuación mostramos los tiempos de simulación.

L	Tiempo de ejecución
30	14
50	14,6
70	15,4

Table 1: Tiempos de ejecución en función del tamaño de L

Las pruebas fueron ejecutadas en la siguiente PC:

- CPU: Intel i7 6700k
- RAM: 32gb ddr4

4 Conclusiones

A modo de conclusión, podemos decir que se implementó satisfactoriamente el algoritmo del autómata celular FHP “lattice gas” para la simulación de fluidos. Aunque la implementación no fue la más eficiente, da buenos resultados, logrando simular el comportamiento complejo del flujo de fluidos.

References

- [1] Dieter A. Wolf-Gladrow, *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models - An introduction*, June 26, 2005.